



Информация за финансиран проект

Наименование на конкурса:
КОНКУРС ЗА ФИНАНСИРАНЕ НА ФУНДАМЕНТАЛНИ НАУЧНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ – 2018 г
Основна научна област или обществен приоритет:
Технически науки
Входящ № на проект:
H27/28
Заглавие на проекта:
Изследване на HELP механизма на водородно окрежкостяване чрез използване на съвременни високопроизводителни хибридни компютърни архитектури: моделни симулации и експерименталното им валидиране
Базова организация:
Институт по металознание, съоръжения и технологии с Център по хидро- и аеродинамика „Акад. Ангел Балевски“ (ИМСТЦХА) при БАН
Партньорски организации:
Институт по информационни и комуникационни технологии (ИИКТ) – БАН
Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):
Доц. д-р Ивайло Христов Кацаров
Общ размер на отпуснатото финансиране:
120 000.00 лв.
Разпределение на сумата по проекта между базовата организация и партньорите
Организация:
ИМСТЦХА-БАН
Сума: 96000.00 лв.
Организация:
ИИКТ – БАН
Сума: 24000.00 лв.



Резюме на проекта:

Водородното окрежкостяване (ВО) е най-разрушителният и непредсказуем, и същевременно най-слабо познатият, механизъм на разрушаване, на който са подложени структурните компоненти. Присъствието на водород води до значителна деградация на механичните свойства и оттам до загуба на структурна цялост на обширни области в металите и сплавите. Всички метали в някаква степен са податливи на ВО. Въпреки че вредният ефект на Н върху механичните свойства на металите и сплавите е обширно проучван в продължение на почти 100 години, механизмите, които отговарят за водородното окрежкостяване, все още не са добре разбрани и има значителни разногласия в научната литература дори по отношение на процесите причиняващи ВО в прости, номинално чисти метали. В научната литература се предлагат множество механизми на окрежкостяването. Механизмите с най-солидна експериментална и теоретична основа са Hydrogen-enhanced decohesion (HEDE) и Hydrogen enhanced localised plasticity (HELP). Смята се, че HEDE се предизвиква от отслабване на междоатомните кохезионни сили в местата с концентрация на Н. HELP предполага, че водородното окрежкостяване е резултат от повишената подвижност на дислокациите вследствие присъствието на водород. В рамките на HELP, процесът на разрушаване е по-скоро силно локализиран процес на пластично разрушаване, отколкото окрежкостяване. За разлика от HEDE, HELP е подкрепен с експериментални наблюдения показващи повишена мобилност на дислокациите и формиране на локализирани ивици на приплъзване (localised shear bands) в близост до върха на пукнатини в опитни образци с увеличено водородно съдържание. Въпреки това, физическите процеси които стоят зад увеличената дислокационна мобилност все още не са добре изучени. По-задълбоченото разбиране на HELP механизма налага по-детайлно изучаване отколкото може да бъде осигурено от феноменологията.

Основната цел на това предложение е да осигури по-задълбочено изучаване на HELP механизма на ВО чрез интегриране на моделиране, използващо най-съвременни многомащабни (multiscale) методи и експериментални техники, подходящи за изследване на процесите на окрежкостяване. Това ще доведе до идентификация на режими и микроструктури, устойчиви на ВО и потенциално ще повлияе на проектирането на нови стомани и сплави за инженерни приложения. Ние ще използваме Fe за моделна система. Целта ще бъде постигната чрез изпълнение на следните задачи:

1. Разработване на многомащабни модели, които описват целият набор от процеси протичащи на различни нива и съдействащи за водородно предизвиканото увеличение на дислокационната мобилност в Fe.
 2. Изучаване на влиянието на Н върху взаимодействията между дислокациите, локалното пренареждане на дислокациите и формиране на сплитания и клетъчна структура в Fe.
 3. Валидиране на моделите чрез използването на набор от експериментални изследвания и техники за изследване на процесите на нано, мезо и макро нива.
 4. Идентифициране на механични условия и дислокационни структури в Fe, които са устойчиви на ВО и намиране на ефективни инструменти за техния контрол.
- Резултатите от многомащабното моделиране и експерименталните изследвания ще се използват за анализиране и по-дълбоко разбиране на механизмите на ВО в Fe и стомани.



Членове на научния колектив

<i>Организации/участници¹</i>	<i>Бележка²</i>
Базова организация:	
Институт по металознание, съоръжения и технологии с Център по хидро- и аеродинамика „Акад. Ангел Балевски“ (ИМСТЦХА) при БАН	
Ръководител на научния колектив	
Доц. д-р Ивайло Христов Кацаров	
Участници:	
проф. дн Людмил Борисов Дренчев гл. ас. д-р Михаил Димитров Колев доц. д-р Йордан Стефанов Георгиев гл. ас. д-р Ваня Любенова Дякова Мария Костадинова Димитрова Борис Борисов Яначков гл. ас. д-р Борис Людмилов Дренчев чл.-кор. проф. дхн Тони Георгиев Спасов гл. ас. д-р Веселина Точева Рангелова	ПД СТ ПД ПД
Партньорска организация:	
Институт по информационни и комуникационни технологии (ИИКТ) – БАН	
Участници:	
Доц. д-р Невена Илиева Гл. асист. д-р Елена Лилкова Проф. дфмн Леандър Литов Гл. асист. д-р Пейчо Петков Тодор Трендафилов Иванов	МУ, ПД ДО

Общ брой млад учен (МУ) 1

Общ брой постдокторант (ПД) 4

Общ брой докторанти (ДО) 1

Общ брой студенти (СТ) 1

¹ Отбележете академичната длъжност, научната степен, име и фамилия на всеки участник

² Отбележете дали участникът в колектива е млад учен (МУ), постдокторант (ПД), докторанти (ДО) или студенти (СТ), пенсионер (ПН) или учен от чужбина (УЧ) и съответната бройка.